



TITLE:

# 格子グリーン関数に対するMellin-Barnes積分の応用：単純立方格子 (Lattice Green's Function)

AUTHOR(S):

猪苗代, 盛

---

CITATION:

猪苗代, 盛. 格子グリーン関数に対するMellin-Barnes積分の応用：単純立方格子 (Lattice Green's Function). 数理解析研究所講究録 1971, 130: 67-77

ISSUE DATE:

1971-11

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/106576>

RIGHT:

# 格子グリーン関数に対する Mellin-Barnes 積分 の応用 — 単純立方格子 —

東北大工 猪苗代 盛

## § 1. 序

格子グリーン関数を具体的に計算する場合に格子スペクトルの中のエネルギーに対する表式を、格子スペクトル外のエネルギーに対する表式から解析接続によって求めることは、<sup>1)</sup>一つの有力な方法と考えられる。我々は Mellin-Barnes 積分<sup>1)</sup>を利用して解析接続によりグリーン関数の種々の巾級数表示を求める。

### (1) Mellin-Barnes 積分

Mellin-Barnes 積分

$$f(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} \phi(s) z^{-s} ds, \quad |\arg z| < \pi \quad (1.1)$$

$$\phi(s) = \frac{\Gamma(\alpha_1+s) \cdots \Gamma(\alpha_m+s) \Gamma(\beta_1-s) \cdots \Gamma(\beta_n-s)}{\Gamma(\gamma_1+s) \cdots \Gamma(\gamma_p+s) \Gamma(\delta_1-s) \cdots \Gamma(\delta_q-s)} \quad (1.2)$$

と考える。

積分の収束性をしるために

$$\begin{aligned} S &= \sigma + it \\ z &= R e^{i\phi} \end{aligned} \quad (1.3)$$

と書き  $|t| \rightarrow \infty$  の被積分関数の行動をしらべる。

$$|z^{-s}| = R^{-\sigma} e^{\phi t} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} |\Gamma(s)| &= |\Gamma(\sigma + it)| \\ &\approx e^{-\frac{1}{2}\pi|t|} |t|^{\sigma - \frac{1}{2}}, \quad |t| \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (4)$$

従って  $|t| \rightarrow \infty$  のとき integrand の絶対値は

$$e^{-\frac{1}{2}K\pi|t|} |t|^{K\sigma + k} R^{-\sigma} e^{\phi t} \quad (5)$$

となる。ここで

$$K = m + n - p - g$$

$$K = m - n - p + g \quad (6)$$

$$\begin{aligned} k &= (\alpha_1 - \frac{1}{2}) + (\alpha_2 - \frac{1}{2}) + \cdots + (\beta_1 - \frac{1}{2}) + (\beta_2 - \frac{1}{2}) + \cdots \\ &\quad - (\gamma_1 - \frac{1}{2}) - (\gamma_2 - \frac{1}{2}) - \cdots - (\delta_1 - \frac{1}{2}) - (\delta_2 - \frac{1}{2}) - \cdots \end{aligned}$$

ここで  $K, K, k$  の値によりいくつかの場合に分けて考える。

i) 第I型:  $K > 0$  即ち  $m + n > p + g$

(分子の  $\Gamma$  関数の数が分母の  $\Gamma$  関数の数より多い)

積分(1)は  $|\arg z| < \min(\pi, \frac{1}{2}K\pi)$  で収束し、この解析関数である。

ii) 第II型:  $K = 0$  i.e.  $m + n = p + g$  (分母と分子の  $\Gamma$  関数の数が等しい.)

$$\text{and } K = m - n - p + g \neq 0$$

このとき integrand は large  $|t|$  に対し

$$|t|^{K\sigma+k} R^{-\sigma} e^{\phi t}$$

となる。積分が収束するためには  $\phi=0$  即ち  $\sigma$  は正の数でなければならぬ。結局 integrand は

$$|t|^{K\sigma+k} R^{-\sigma} \quad (7)$$

となる。

$K\sigma+k < -1$  なら積分は絶対収束し ( $K\sigma+k < 0$  なら収束)

$K < 0$  なら

$$f(R) = \left[ \frac{1}{2\pi i} \int \phi(s) z^{-s} ds \right]_{z=R} \quad (8)$$

$K > 0$  なら

$$f(R) = \left[ \frac{1}{2\pi i} \int \phi(s) z^{-s} ds \right]_{z=R} \quad (8')$$

とあらわせることが示される。ここで (8), (8)' の [ ] 内の積分は complex  $z$  に対し収束し,  $|\arg z| < \pi$  で  $z$  の analytic function である。

iii) 第Ⅲ型:  $\left. \begin{matrix} K=0 \\ K=0 \end{matrix} \right\} \text{ i.e. } m=p, n=f$

$k < -1$

ii) と同様に  $\sigma$  が正のときだけ収束する。従って integrand は

$$|t|^k R^{-\sigma} \quad (9)$$

となる。 $k < -1$  で積分は絶対収束し

$R > 1$  ならば

$$f(R) = \left[ \frac{1}{2\pi i} \int_{\underline{\Gamma}} \phi(s) z^{-s} ds \right]_{z=R} \quad (10)$$

$R < 1$  ならば

$$f(R) = \left[ \frac{1}{2\pi i} \int_{\overline{\Gamma}} \phi(s) z^{-s} ds \right]_{z=R} \quad (10)'$$

とあらわせることが示される。ここで (10), (10)' の [ ] 内の積分は  $|\arg z| < \pi$  かつ  $|z| \geq 1$  の  $z$  の analytic function である。

一般にこの二つの analytic function は同じ関数とは限らない。しかし、(1) は絶対収束なので  $z=1$  で連続である。

iv) 第IV型:  $\left. \begin{matrix} K=0 \\ k=0 \end{matrix} \right\} \text{ i. e. } m=p, n=q$   
 $-1 \leq k < 0$

$z \neq 1$  では第III型と同様な性質をもつ。

$z=1$  では連続とは限らなくなる。

## § 2. 単純立方格子のクリーン関数<sup>2)</sup>

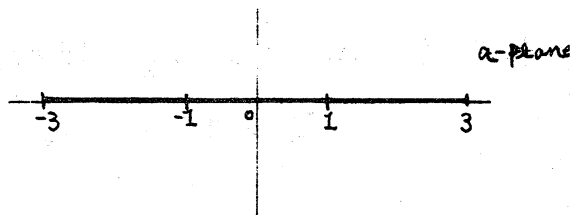
単純立方格子の原点におけるクリーン関数は

$$I(\alpha) = \frac{1}{\pi^3} \iiint_{\cdot} \frac{dx dy dz}{\alpha - \cos x - \cos y - \cos z} \quad (2.1)$$

であらわされる。<sup>2)</sup> この関数は複素  $\alpha$  平面の虚軸上の線分

$-3 \leq \alpha \leq 3$  以外の領域で正則な関数である。

$-3 < \alpha < 3$  では  $\alpha = \pm 1, \pm 3$  が特異点になっている。(Van Hove singularities)



$I(a)$  を Mellin-Barnes 積分であらわすと  $a > 3$  ではよく知られた級数表示がえられる。Mellin-Barnes 積分の変形により  $0 < a < 1$  及び  $1 < a < 3$  の expression がえられる。 $a < 0$  の表式は (2.1) の形を考慮すると  $a > 0$  の表式から直ちにえられる。

Im  $a > 0$  ならば

$$\begin{aligned} I(a) &= -\frac{i}{\pi^3} \int_0^\infty dt \int_0^\pi dx \int_0^\pi dy \int_0^\pi dz \\ &\quad \times \exp[i(a - \cos x - \cos y - \cos z)t] \\ &= -i \int_0^\infty e^{iat} [J_0(t)]^3 dt \end{aligned} \quad (2.2)$$

$[J_0(t)]^2$  を Mellin-Barnes 積分であらわすと

$$[J_0(t)]^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{2\pi i} \int_{-\delta-i\infty}^{-\delta+i\infty} \frac{\Gamma(-s) \Gamma(s+\frac{1}{2}) t^{2s}}{[\Gamma(s+1)]^2} ds$$

従って

$$I(a) = \frac{-i}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{2\pi i} \int_{-\delta-i\infty}^{-\delta+i\infty} ds \frac{\Gamma(-s) \Gamma(s+\frac{1}{2})}{[\Gamma(s+1)]^2} \int_0^\infty e^{iat} J_0(t) t^{2s} dt$$

これに関する積分は  $\text{Im } a > 0$  に収束し hypergeometric functions を使ってみられる。

$$\int_0^\infty x^s \dots = \frac{\Gamma(2s+1)}{(-ia)^{2s+1}} {}_2F_1\left(s+\frac{1}{2}, s+1; 1; \frac{1}{x^2}\right)$$

従って

$$I(a) = \frac{1}{\pi a} \frac{1}{2\pi i} \int ds \frac{\Gamma(-s) [\Gamma(s+\frac{1}{2})]^2}{\Gamma(s+1)} \left(-\frac{4}{a^2}\right)^s \times {}_2F_1\left(s+\frac{1}{2}, s+1; 1; \frac{1}{x^2}\right) \quad (2.3)$$

§2-1  $a > 3$

$|a| > 1$  なら  ${}_2F_1$  を  $\frac{1}{x^2}$  の級数に展開できる。

$$I(a) = \frac{1}{\pi a} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n! n!} \left(\frac{1}{a^2}\right)^n \times \frac{1}{2\pi i} \int ds \left(-\frac{4}{a^2}\right)^s \frac{\Gamma(-s) \Gamma(s+\frac{1}{2}) \Gamma(s+\frac{1}{2}+n) \Gamma(s+1+n)}{[\Gamma(s+1)]^2}$$

$S$ -積分は Mellin-Barnes 積分の第 I 型であり  $|a| > 2$  なら積分路は右半平面に閉じさせることができる。このとき

$S = 0, 1, 2, \dots, m, \dots$  が  $I$  位の極留数計算により

$$I(a) = \frac{1}{\pi a} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\Gamma(m+\frac{1}{2}) \Gamma(m+n+\frac{1}{2}) \Gamma(m+n+1) 4^m}{(n!)^2 (m!)^3} \left(\frac{1}{a^2}\right)^{m+n} \quad (2.4)$$

がえられる。この 2 重級数は  $|a| > 3$  に収束すること表示される。和の順序変更により  $\frac{1}{a^2}$  の中級数がえられる。

$$I(a) = \frac{1}{\pi a} \sum_{p=0}^{\infty} \Gamma(p + \frac{1}{2}) \Gamma(p+1) \left(\frac{1}{a^2}\right)^p \\ \times \sum_{m=0}^p \frac{\Gamma(m + \frac{1}{2}) 4^m}{(m!)^2 [(p-m)!]^2} \quad (2.5)$$

あさらに

$|a| > 3$  に対しては  $I(a)$  は実数で虚数部は 0 である。

§2-2  $0 < a < 1$

${}_2F_1(\cdot; \cdot; 1/a^2)$  の  $0 < a < 1$  における関数形は Kummer の relation により  ${}_2F_1(\cdot; \cdot; a^2)$  であらわされる。

従って (2.3) は

$$I(a) = \frac{1}{\pi a} \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma} ds \frac{\Gamma(-s) [\Gamma(s + \frac{1}{2})]^2}{\Gamma(s+1)} \left(-\frac{4}{a^2}\right)^s \\ \times \left[ \frac{\Gamma(-\frac{1}{2})}{\Gamma(s + \frac{1}{2}) \Gamma(-s)} \left(-\frac{1}{a^2}\right)^{-s-1} {}_2F_1\left(s+1, s+1; \frac{3}{2}; a^2\right) \right. \\ \left. + \frac{\Gamma(\frac{1}{2})}{\Gamma(s + \frac{1}{2}) \Gamma(-s + \frac{1}{2})} \left(-\frac{1}{a^2}\right)^{-s-\frac{1}{2}} {}_2F_1\left(s + \frac{1}{2}, s + \frac{1}{2}; \frac{1}{2}; a^2\right) \right] \\ = I_R(a) + i I_I(a) \quad (2.6)$$

ここで  $s$ -積分をあらかじめ左半面にまわしておく。

右辺の  ${}_2F_1$  を展開すると、



$$I_k(a) = a \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^{2n}}{n! \Gamma(n+\frac{3}{2})} \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma} ds \frac{\Gamma(s+\frac{1}{2}) [\Gamma(s+1+n)]^2 4^s}{[\Gamma(s+1)]^3}$$

$s + \frac{1}{2} = 0, -1, -2, \dots$  に 1 位の極があり, その留数を計算するに より

$$I_k(a) = -\frac{a}{2\pi} \sum_n \sum_m \frac{[\Gamma(\frac{1}{2}+m)]^3 (\frac{1}{4})^m a^{2n}}{n! m! \Gamma(\frac{3}{2}+n) [\Gamma(\frac{1}{2}-n+m)]^2} \quad (2.7)$$

これは  $|a| < 1$  で収束する。

同様にして

$$I_I(a) = -\frac{i}{2\pi^2} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{[\Gamma(m+n+\frac{1}{2})]^3 (\frac{a^2}{4})^n (\frac{1}{4})^m}{n! \Gamma(\frac{1}{2}+n) (m!)^2 \Gamma(m+n+1)} \quad (2.7)'$$

$$\times \left\{ -3 \psi(\frac{1}{2}+m+n) + 2 \psi(1+m) + \psi(1+m+n) + \log 4 \right\}$$

( $\psi$  は 2 位の極の留数から出てくる。)

§2-3  $1 < a < 3$

この変数の範囲に対しては  $a^2=5$  を中心とする展開が求められる。これは  $|a^2-5| < 4$  i.e.  $1 < a < 3$  で収束する。

$a^2$  の大きな値に対して (2.4) を

$$I(a) = \frac{1}{\pi a} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{[\Gamma(\frac{1}{2}+m)]^2}{(m!)^2} \left(\frac{4}{a^2}\right)^m {}_2F_1\left(m+1, m+\frac{1}{2}, 1; \frac{1}{a^2}\right) \quad (2.8)$$

Kummer's relation

$${}_2F_1(a, b, c; z) = (1-z)^{-a} {}_2F_1(a, c-b, c; \frac{z}{z-1}) \quad (2.9)$$

を使うと

$$I(a) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{1}{a^2-1}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{m=0}^{\infty} \left[\frac{\Gamma(\frac{1}{2}+m)}{m!}\right]^2 \left(\frac{1}{a^2-1}\right)^m {}_2F_1\left(m+\frac{1}{2}, -m, 1; \frac{1}{1-a^2}\right)$$

${}_2F_1$  を展開し和の順序を変えると

$$I(a) = \frac{1}{\pi} \left( \frac{1}{a^2-1} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\frac{1}{2}+n) \Gamma(\frac{1}{2}+2n)}{(n!)^3} \left( \frac{2}{a^2-1} \right)^{2n} \\ \times {}_2F_1 \left( \frac{1}{2}+n, \frac{1}{2}+2n; 1+n; \frac{4}{a^2-1} \right)$$

再び Kummer's relation (2.9) を使うと

$$I(a) = \frac{1}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\frac{1}{2}+n) \Gamma(\frac{1}{2}+2n)}{(n!)^3} 4^n \left( \frac{1}{a^2-5} \right)^{2n+\frac{1}{2}} \\ \times {}_2F_1 \left( \frac{1}{2}, \frac{1}{2}+2n; 1+n; \frac{4}{5-a^2} \right) \\ = \frac{1}{\pi} \left( \frac{1}{a^2-5} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{2\pi i} \int \frac{\Gamma(-t) \Gamma(\frac{1}{2}+t) \Gamma(\frac{1}{2}+2t)}{[\Gamma(1+t)]^2} \left\{ -4 \left( \frac{1}{a^2-5} \right)^2 \right\}^t dt \\ \times {}_2F_1 \left( \frac{1}{2}, \frac{1}{2}+2t; 1+t; \frac{4}{5-a^2} \right)$$

hypergeometric function の  $|\frac{4}{5-a^2}| > 1$  に対する表現を入れれば

$$I(a) = \frac{1}{\pi} \left( \frac{1}{a^2-5} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{2\pi i} \int \frac{\Gamma(-t) \Gamma(\frac{1}{2}+t) \Gamma(\frac{1}{2}+2t)}{[\Gamma(1+t)]^2} \left\{ -4 \left( \frac{1}{a^2-5} \right)^2 \right\}^t dt \\ \times \left[ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \Gamma(\frac{1}{2}+n) \Gamma(2t-n)}{n! \Gamma(\frac{1}{2}-n+t)} \left( \frac{a^2-5}{4} \right)^{n+\frac{1}{2}} \right. \\ \left. + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \Gamma(\frac{1}{2}+2t+n) \Gamma(-n-2t)}{n! \Gamma(\frac{1}{2}-n-t)} \left( \frac{a^2-5}{4} \right)^{n+2t+\frac{1}{2}} \right]$$

この中の積分は Mellin-Barnes 積分の第 I 型であり、左半面に積分路を閉じると留数計算により

$$I(a) = I_R(a) + I_L(a) \quad (2.10)$$

$$I_R(a) = \frac{1}{4\pi^{\frac{3}{2}}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \left( \frac{a^2-5}{4} \right)^n \\ \times \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m \Gamma(\frac{1}{2}+m) \Gamma(\frac{1}{2}+n+m) \Gamma(\frac{1}{2}+n+2m)}{(m!)^2 (n+2m)!} \left( \frac{1}{4} \right)^m$$

$$\times \left\{ \psi\left(\frac{1}{2}+m\right) - \psi\left(\frac{1}{2}+n+m\right) - 2\psi\left(\frac{1}{2}+n+2m\right) \right. \\ \left. + 2\psi(1+m) + 2\psi(1+n+2m) + \log 4 \right\} \quad (2.11)$$

$$I(a) = \frac{-i}{2\pi^{\frac{5}{2}}} \sum_{p=0}^{\infty} \frac{1}{(p+1)!} \left(\frac{5-a^2}{4}\right)^{p+1} \\ \times \sum_{n=0}^{\leq \frac{p}{2}} \frac{4^n [\Gamma(\frac{1}{2}+n)]^2 \Gamma(p-2n+\frac{1}{2}) \Gamma(p-n+1)}{n! \Gamma(p-2n+1)}$$

$$- \frac{i}{4\pi^{\frac{5}{2}}} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\frac{1}{2}+m) \Gamma(\frac{1}{2}+n+m) \Gamma(\frac{1}{2}+n+2m)}{(m!)^2 n! (n+2m)!}$$

$$\times \left(\frac{1}{4}\right)^m \left(\frac{5-a^2}{4}\right)^n \quad (2.11)'$$

§ 3. 任意の格子点におけるグリーン関数

$$I_{lmn}(a) = \frac{1}{\pi^3} \iiint_0^{\pi} \frac{\cos lx \cdot \cos my \cdot \cos nz}{a - \cos x - \cos y - \cos z} dx dy dz$$

にも同様な計算を行うことが出来る。その他2次元の *rectangular lattice* 及びその特別な場合として *square lattice* の場合も, Mellin-Barnes 積分を利用して級数表示が求められている。

#### § 4. 問題点

この Mellin-Barnes 積分の方法では, simple cubic lattice のグリーン関数の  $a=1$  及び  $a=3$  における展開がまだ見出されていない。格子点  $l, m, n$  が原点からはなれている場合のグリーン関数の漸近形と共に、今後に残された問題である。

## reference

- 1). Bateman's Manuscript Project, Higher Transcendental Functions, ed. A. Erdélyi, McGraw-Hill, New York (1953);  
A. L. Dixon and W. L. Ferrar, Quant. J. Math., Oxford.
- 2). S. Katsura, S. Inawashiro, and Y. Abe, J. Math. Phys. (1971).
- 3). S. Katsura and S. In<sub>a</sub>wash<sub>i</sub>ro, J. Math. Phys. (1971).